

6 Implementação Numérica

6.1. Introdução

A maior dificuldade apresentada na implementação computacional está relacionada com os graus de singularidade que aparecem nos termos de integração. Eles vão desde o caráter fraco logarítmico $O(\ln(r))$, uma forte singularidade de $O(1/r^2)$ até uma hiper-singularidade $O(1/r^2)$.

Em Polyzos et al [22] utiliza-se na integração das singularidades a metodologia da manipulação direta do valor principal de Cauchy. Essa avaliação direta faz uso do processo limite nas partes singulares dos termos respectivos mais uma integração analítica efetuada num sistema de coordenadas locais no elemento onde o ponto de singularidade está contido. A base teórica disto é extraída dos trabalhos desenvolvidos por Guiggiani [24],[25] e Dumont et al [33]-[40].

6.2. Montagem das Matrizes

Admite-se um elemento geral discreto cuja numeração esteja designada por e , pertencente ao sólido de contorno suave Γ , onde os sub-elementos que conformam o elemento estão definidos através de pontos identificados pelo vetor de incidência nodal $\mathbf{ig}^e = [ig^e_1, ig^e_2, ig^e_3, \dots]$ ilustrado na Figura 10.

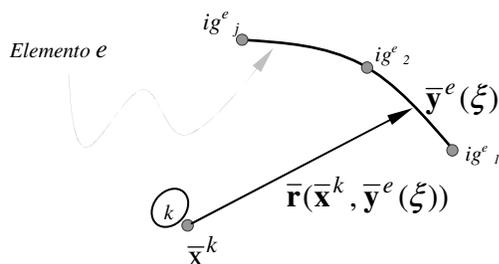


Figura 32. - Elemento de contorno que mostra os parâmetros utilizados para a integração

A seguir descreve-se os termos das expressões (6-1) e (6-2). Seja n_e o número de elementos discretizados no sólido conformado por n_n pontos, a ordem do elemento o^e ($=2$ para elemento quadrático) e o número de ponto nodal fonte o^e identificada com $\bar{\mathbf{x}}$. Seja N^j a função isoparamétrica que representa as funções de forma, que vincula os deslocamentos \mathbf{u}_j^e dos pontos do elemento ig^e_j , sendo que j subscrito indica o número de ponto (x,y) (e varia de 1 à o número total de pontos por elemento = o^e+1); finalmente, seja J o jacobiano da transformação de coordenadas do ponto (x,y) à coordenada paramétrica ξ .

Tendo em consideração as condições de contorno apropriadas e as equações da formulação do método é possível chegar às seguintes expressões:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \mathbf{u}(\bar{\mathbf{x}}^k) + \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{o^e+1} \int_0^1 \tilde{\mathbf{P}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi \cdot \mathbf{q}_j^e + \\ & \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{o^e+1} \int_0^1 \tilde{\mathbf{R}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi \cdot \mathbf{u}_j^e = \\ & \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{o^e+1} \int_0^1 \tilde{\mathbf{U}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi \mathbf{P}_j^e + \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{o^e+1} \int_0^1 \tilde{\mathbf{Q}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi \mathbf{R}_j^e \end{aligned} \quad (6-1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \mathbf{q}(\bar{\mathbf{x}}^k) + \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{o^e+1} \int_0^1 \frac{\partial \tilde{\mathbf{P}}^*}{\partial n^x}(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi \cdot \mathbf{q}_j^e + \\ & \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{o^e+1} \int_0^1 \frac{\partial \tilde{\mathbf{R}}^*}{\partial n^x}(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi \cdot \mathbf{u}_j^e = \\ & \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{o^e+1} \int_0^1 \frac{\partial \tilde{\mathbf{U}}^*}{\partial n^x}(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi \cdot \mathbf{P}_j^e + \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{j=1}^{o^e+1} \int_0^1 \frac{\partial \tilde{\mathbf{Q}}^*}{\partial n^x}(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi \cdot \mathbf{R}_j^e \end{aligned} \quad (6-2)$$

É possível adotar uma numeração global que associe a numeração do elemento e e a numeração local j através de um número β e o vetor de incidência nodal $\beta \rightarrow ig^e_j$, ilustrado na expressão (6-3):

$$\beta \rightarrow \begin{cases} [ig_{o^{e+1}}^{e-1}, N^{o^{e+1}}] e [ig_1^e, N^1] & \text{caso 1 : ponto que é final no elemento } e - 1 \text{ mas inicial em } e \\ [ig_j^e, N^j] & \text{caso 2 : ponto local } j \text{ que é intermedio no elemento } e \\ [ig_{o^{e+1}}^e, N^{o^{e+1}}] e [ig_1^{e+1}, N^1] & \text{caso 3: ponto que é final no elemento } e \text{ mas inicial em } e+1 \end{cases} \quad (6-3)$$

Desta forma, os deslocamentos clássicos e não clássicos em um nó podem ser calculados respectivamente através das seguintes expressões:

$$\frac{1}{2} \mathbf{u}^k + \sum_{\beta=1}^{n_n} \tilde{\mathbf{H}}_{\beta}^k \mathbf{u}^{\beta} + \sum_{\beta=1}^{n_n} \tilde{\mathbf{K}}_{\beta}^k \mathbf{q}^{\beta} = \sum_{\beta=1}^{n_n} \tilde{\mathbf{G}}_{\beta}^k \mathbf{P}^{\beta} + \sum_{\beta=1}^{n_n} \tilde{\mathbf{L}}_{\beta}^k \mathbf{R}^{\beta} \quad (6-4)$$

$$\frac{1}{2} \mathbf{q}^k + \sum_{\beta=1}^{n_n} \tilde{\mathbf{S}}_{\beta}^k \mathbf{u}^{\beta} + \sum_{\beta=1}^{n_n} \tilde{\mathbf{T}}_{\beta}^k \mathbf{q}^{\beta} = \sum_{\beta=1}^{n_n} \tilde{\mathbf{V}}_{\beta}^k \mathbf{P}^{\beta} + \sum_{\beta=1}^{n_n} \tilde{\mathbf{W}}_{\beta}^k \mathbf{R}^{\beta} \quad (6-5)$$

Se $\tilde{\mathbf{X}}^*$ representa qualquer das grandezas $\tilde{\mathbf{P}}^*, \tilde{\mathbf{R}}^*, \tilde{\mathbf{U}}^*, \tilde{\mathbf{Q}}^*$, etc. então a matriz $\tilde{\mathbf{M}}_{\beta}^k$ de ordem $[2 \times 2]$ representaria respectivamente e analogamente a $\tilde{\mathbf{H}}_{\beta}^k, \tilde{\mathbf{K}}_{\beta}^k, \tilde{\mathbf{G}}_{\beta}^k, \tilde{\mathbf{L}}_{\beta}^k$, etc. e definida por:

$$\tilde{\mathbf{M}}_{\beta}^k = \begin{cases} \int_0^1 \tilde{\mathbf{X}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^{e-1}(\xi)) N^{o^{e+1}}(\xi) J(\xi) d\xi + \int_0^1 \tilde{\mathbf{X}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^1(\xi) J(\xi) d\xi & \text{caso1} \\ \int_0^1 \tilde{\mathbf{X}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^j(\xi) J(\xi) d\xi & \text{caso2} \\ \int_0^1 \tilde{\mathbf{X}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^e(\xi)) N^{o^{e+1}}(\xi) J(\xi) d\xi + \int_0^1 \tilde{\mathbf{X}}^*(\bar{\mathbf{x}}^k, \bar{\mathbf{y}}^{e+1}(\xi)) N^1(\xi) J(\xi) d\xi & \text{caso3} \end{cases} \quad (6-6)$$

Fazendo a colocação destas equações nos n_n pontos do sólido é possível a obtenção de um sistema de $4n_n$ equações representado na forma matricial dado por.

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\mathbf{H}}_{[\tilde{\mathbf{P}}]} & \tilde{\mathbf{K}}_{[\tilde{\mathbf{R}}]} \\ \tilde{\mathbf{S}}_{[\partial \tilde{\mathbf{P}}]} & \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{I}} + \tilde{\mathbf{T}}_{[\partial \tilde{\mathbf{R}}]} \end{bmatrix} \cdot \left\{ \begin{matrix} \mathbf{u} \\ \partial \mathbf{u} / \partial n = \mathbf{q} \end{matrix} \right\} = \begin{bmatrix} \tilde{\mathbf{G}}_{[\tilde{\mathbf{U}}]} & \tilde{\mathbf{L}}_{[\tilde{\mathbf{Q}}]} \\ \tilde{\mathbf{V}}_{[\partial \tilde{\mathbf{U}}]} & \tilde{\mathbf{W}}_{[\partial \tilde{\mathbf{Q}}]} \end{bmatrix} \cdot \left\{ \begin{matrix} \mathbf{P} \\ \mathbf{R} \end{matrix} \right\} \quad (6-7)$$

onde \mathbf{u} tem $2n_n$ graus de liberdade clássicos correspondentes ao n_n pontos e \mathbf{q} tem $2n_n$ graus de liberdade de segunda ordem correspondente aos mesmos n_n pontos. As matrizes $\tilde{\mathbf{H}}, \tilde{\mathbf{K}}, \tilde{\mathbf{S}}$, etc. são da ordem $[2n_n \times 2n_n]$ e os subscritos indicam simplesmente as grandezas as quais estão referidas.

6.3. Análise da Singularidade na Integração Numérica para Elasticidade Gradiente

Um aspecto interessante é que as tensões totais (σ_{jim}) e as forças de tração (P_{im}) são influenciadas por maiores graus de singularidade; o outro é que na solução fundamental (U_{im}) e nas deformações (ε_{jim}) não têm-se singularidade e são contínuas quando o ponto fonte é igual ao ponto de avaliação.

6.3.1. Transformação dos Termos de Integração a Series de Potências

Para se identificar as singularidades das grandezas \mathbf{P}^* , \mathbf{Q}^* , etc., foi necessário transformar essas expressões em séries de potências de forma tal de decompor as funções de Bessel numa parcela logarítmica $O(\ln(r))$, outra não singular, outra parcela de forte singularidade $O(1/r)$ e finalmente outra parcela hiper-singular $O(1/r^2)$.

A decomposição da função de Bessel é possível fazer a partir da solução fundamental \mathbf{U}^* , já que todos os termos de integração \mathbf{Q}^* , \mathbf{R}^* , \mathbf{P}^* , etc., são derivados dela, chegando atingir até a quarta ordem de derivação. Como a solução fundamental depende essencialmente das funções X e Y como se apresenta na solução fundamental:

$$\tilde{U}_{im}^* = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)} [Y\delta_{im} - Xr_{,i}r_{,m}] \quad (6-8)$$

então é possível identificar as singularidades dos termos respectivos em função da singularidade apresentada enquanto cresce a ordem de derivação de X e Y até a quarta ordem.

A seguir apresenta-se o desenvolvimento das séries de X . A natureza da singularidade de Y é idêntica a X . As séries ao redor do ponto $r=0$, em r , estão expressas para 2D pela seguinte equação:

$$X = \left(\frac{r^2}{2g^2} + O(r^4) \right) \ln(r) + \left(\frac{4\ln(1/2g) + 4\gamma + 3}{8g^2} \right) r^2 + O(r^4) \quad (6-9)$$

Observa-se que a expressão anterior não tem singularidade quando $r \rightarrow 0$.

$$X' = \left(\frac{r}{g} + O(r^3) \right) \ln(r) + \left(\frac{4\ln(1/2g) + 4\gamma - 1}{4g^2} \right) r + O(r^3) \quad (6-10)$$

A primeira derivada de X também não tem singularidade.

$$X'' = \left(\frac{1}{g^2} + \frac{r^2}{2g^4} + O(r^4) \right) \ln(r) + \left(\frac{4\ln(1/2g) + 4\gamma + 3}{4g^2} \right) \\ + \left(\frac{6\ln(1/2g) + 6\gamma - 5}{12g^4} \right) r^2 + O(r^4) \quad (6-11)$$

Na segunda derivada a singularidade é fraca e de caráter logarítmica $O(\ln(r))$.

$$X''' = \left(\frac{r}{g^4} + O(r^3) \right) \ln(r) + \frac{1}{rg^2} + \left(\frac{3\ln(1/2g) + 3\gamma - 1}{3g^4} \right) r + O(r^3) \quad (6-12)$$

Entretanto, na terceira derivação apresenta-se uma singularidade forte $O(1/r)$.

$$X^{iv} = \left(\frac{1}{g^4} + O(r^2) \right) \ln(r) - \frac{1}{r^2g^2} + \left(\frac{3\ln(1/2g) + 3\gamma + 2}{3g^4} \right) + O(r^2) \quad (6-13)$$

Finalmente na quarta derivação apresenta-se a hiper-singularidade de $O(1/r^2)$.

Toda essa análise é apresentada de forma resumida na Tabela 1:

Termo de Integração	Ordem de Derivação de X, Y	Tipo de Singularidade
U^*	X, Y	No hay.
$Q^*, \partial U^*/\partial n$	X', Y'	No hay
$R^*, \partial Q^*/\partial n$	X'', Y''	$O(\ln(r))$
$P^*, \partial R^*/\partial n$	X''', Y'''	$O(1/r)$
$\partial P^*/\partial n$	$X''', Y''', X^{iv}, Y^{iv}$	$O(1/r), O(1/r^2)$

Tabela 1. - Identificação do tipo de singularidade que se apresentam nas diferentes grandezas de integração do método de elementos de contorno para elasticidade gradiente.

6.3.2. Integração Numérica

Adota-se à $\tilde{\mathbf{A}}^*$ uma grandeza qualquer de integração decomposta em séries com quatro termos de integração:

$$\int_0^1 \tilde{\mathbf{A}}^* d\xi = \int_0^1 \tilde{\mathbf{A}}_L^* \ln(r) d\xi + \int_0^1 \tilde{\mathbf{A}}_G^* \ln(r) d\xi + \int_0^1 \frac{\tilde{\mathbf{A}}_{S_1}^*}{r} d\xi + \int_0^1 \frac{\tilde{\mathbf{A}}_{S_2}^*}{r^2} d\xi \quad (6-14)$$

A integração seria feita do seguinte jeito:

$$\begin{aligned} 1) & \int_0^1 \tilde{\mathbf{A}}_L^* \ln(r) d\xi; \text{ Quadratura de Gauss Logarítmico} \\ 2) & \int_0^1 \tilde{\mathbf{A}}_G^* d\xi; \text{ Quadratura de Gauss Regular} \\ 3) & PF \int_0^1 \frac{\tilde{\mathbf{A}}_{S_1}^*}{r} d\xi = GL \int_0^1 \frac{\tilde{\mathbf{A}}_{S_1}^*}{r} d\xi + \tilde{\mathbf{A}}_{S_1}^* \Big|_{\xi=0} \left(\ln(\bar{r}_0) + \sum_i^{n_g} \frac{h_i}{\xi_i} \right) \end{aligned} \quad (6-15)$$

Onde a primeira parcela representa a integração singular regular de Gauss; \bar{r}_0 é obtido do $r = \bar{r}\xi$ avaliada em $\xi=0$; h_i, ξ_i representam os n_g pontos da quadratura de Gauss.

As grandezas que apresentam a singularidade forte são $\tilde{\mathbf{P}}^*, \partial \tilde{\mathbf{P}}^* / \partial n^x$, e $\partial \tilde{\mathbf{R}}^* / \partial n^x$.

$$4) \int_0^1 \frac{\tilde{\mathbf{A}}_{S_2}^*}{r^2} d\xi \text{ aparece apenas no caso de } \partial \tilde{\mathbf{P}}^* / \partial n^x. \text{ Neste caso, a diagonal}$$

da matriz correspondente é calculada utilizando as propriedades espectrais correspondentes aos deslocamentos de corpo rígido.

6.4. Ponto Fonte $\bar{\mathbf{x}}$

A diferença do método clássico, onde a única informação geométrica do ponto $\bar{\mathbf{x}}$ corresponde às coordenadas cartesianas, no caso da elasticidade gradiente é necessário fazer o cálculo do vetor normal nesse ponto, designado por $\hat{\mathbf{n}}^x$. Para o cálculo de $\hat{\mathbf{n}}^x$ determinou-se o vetor de incidência nodal \mathbf{ig}_i^k e com ele as coordenadas cartesianas x', y' e o jacobiano da transformação dadas por:

$$\begin{aligned}
 x'(\xi_k) &= x_n [ig^k_i] N'_i(\xi_k) = x'_k \\
 y'(\xi) &= y_n [ig^k_i] N'_i(\xi_k) = y'_k \\
 J &= \sqrt{(x'_k)^2 + (y'_k)^2}
 \end{aligned}
 \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} x'(\xi_k) \\ y'(\xi) \\ J \end{aligned}} \right\} (6-16)$$

i representa somatória em i , ()' derivada em relação a ξ , e ξ_k é a coordenada paramétrica que identifica o ponto k .

Finalmente o vetor normal no ponto fonte está dado por:

$$\mathbf{n}^x = [y'_k / J, -x'_k / J] \quad (6-17)$$

6.5. Parâmetros no cálculo de $\tilde{\mathbf{P}}^*$, $\tilde{\mathbf{R}}^*$, $\tilde{\mathbf{U}}^*$, $\tilde{\mathbf{Q}}^*$ etc.

A implementação numérica precisa relativamente de uma grande quantidade de variáveis que precisam ser estruturadas numa seqüência de cálculo apropriada.

- a). Calcula-se as coordenadas de cada elemento e em função da coordenada paramétrica ξ . Neste caso é necessário separar cada elemento em o^e sub elementos e a integração global tem que ser obtida através da soma parcial de cada sub elemento n_s através de uma segunda transformação N^* que normaliza cada sub elemento num intervalo de integração de ξ compreendido em [0..1].

$$\begin{aligned}
 x(\xi) &= x_n [ig^e_i] N^*_i(\xi) - x_k = r_1; \\
 x'(\xi) &= x_n [ig^e_i] N^{*'}_i(\xi) = r'_1 \\
 y(\xi) &= y_n [ig^e_i] N^*_i(\xi) - y_k = r_2 \\
 y'(\xi) &= x_n [ig^e_i] N^{*'}_i(\xi) = r'_2
 \end{aligned}
 \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} x(\xi) \\ x'(\xi) \\ y(\xi) \\ y'(\xi) \end{aligned}} \right\} (6-18)$$

Adicionalmente, é preciso fazer uma segunda derivação para a obtenção do gradiente do vetor normal.

$$\begin{aligned}
 x''(\xi) &= x_n [ig^e_i] N^{*''}_i(\xi) = r''_1 \\
 y''(\xi) &= x_n [ig^e_i] N^{*''}_i(\xi) = r''_2 \\
 J &= \sqrt{(x'^2 + y'^2)}, \\
 \mathbf{n}^y &= [y'/J, -x'/J] \quad \mathbf{r} = [x, y] = [r_1, r_2] \\
 r &= \sqrt{r_1^2 + r_2^2} \quad ; \quad \hat{\mathbf{r}} = [x/r, y/r] = [v_1, v_2]; \quad \text{ou também } v_j = r_j
 \end{aligned}
 \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} x''(\xi) \\ y''(\xi) \\ J \\ \mathbf{n}^y \\ r \end{aligned}} \right\} (6-19)$$

x_n, y_n são coordenadas dos n_n pontos que discretizam ao sólido.

b). Um novo termo que aparece repetidas vezes nesta versão gradiente do método de contorno é o gradiente do vetor normal:

$$(\nabla \hat{\mathbf{n}})_{ij} = n_{i,j} = n'_i(\xi) / r'_j(\xi) \quad (6-20)$$

Onde $r'_j = dr_j / d\xi$ diferente de $r_{,j} = \partial r / \partial r_j$ e por tanto

$$n_{i,j} = \frac{r''_j J + r'_i J'}{J^2 r'_j} (-1)^{i+1}; \text{ onde } J' = r'_i r'_i / J \quad (6-21)$$

c) A partir do item anterior é possível o cálculo do gradiente direcional de superfície:

$$\begin{aligned} (\nabla_S \hat{\mathbf{n}})_{ij} &= (\delta_{ik} - n_i n_k) n_{j,k} = n_{i,j} - n_{j,k} n_i n_k \\ &= D_j n_i \text{ (notação indicial utilizada por Amanatidou e Mindlin)} \end{aligned} \quad (6-22)$$

d) Assim, obtém-se o escalar:

$$\begin{aligned} \nabla_S \cdot \hat{\mathbf{n}} &= n_{p,p} - n_{p,q} n_q n_p \\ &= D_p n_p \end{aligned} \quad (6-23)$$

6.6. Cálculo dos tensores das equações principais do método.

Com a finalidade de elaborar o protótipo de um programa de aplicação mais geral, o método foi implementado no programa Maple. Com ele é possível programar de um jeito relativamente condensado o algoritmo de integração para a montagem das matrizes. Como os exemplos a desenvolver têm caráter acadêmico, os graus de liberdade não são grandes e é possível criar uma ferramenta prática para começar o estudo desta teoria de maneira versátil. Mas, a prática mostra que o processamento deste jeito é devagar e que é mais rápida a decomposição em parcelas feita por Polyzos [13] apresenta nas equações (5-13)-(5-18) do Capítulo 5.

Para tanto inicia-se como a solução fundamental em 2D dada por:

$$\tilde{U}^*_{im} = \frac{1}{16\pi\mu(1-\nu)} [Y\delta_{im} - Xr_{,i}r_{,m}] = u_{im} \quad (6-24)$$

onde:

$$X = -2 + \frac{8g^2}{r^2} - 4K_2 \left(\frac{r}{g} \right) \quad (6-25)$$

$$Y = -2(3-4\nu) \ln r + \frac{4g^2}{r^2} - 2(3-4\nu)K_0 \left(\frac{r}{g} \right) - 2K_2 \left(\frac{r}{g} \right) \quad (6-26)$$

No programa Maple é suficiente entrar diretamente com as sentenças das seguintes expressões:

$$\begin{aligned} \tilde{\tau}_{jim} &= \mu(\tilde{U}_{im,j}^* + \tilde{U}_{jm,i}^*) + \lambda \tilde{U}_{km,k}^* \delta_{im} \\ \tilde{\mu}_{kjim} &= g^2 \tilde{\tau}_{jim,k} \\ \tilde{Q}_{im}^* &= \tilde{U}_{im,k}^* n_k \\ \tilde{R}_{im} &= \tilde{\mu}_{kjim} n_k n_j = g^2 n_k n_j \tilde{\tau}_{jim,k} \\ \tilde{P}_{im} &= n_j \tilde{\tau}_{jim} - \tilde{\mu}_{kjim,l} n_j n_k n_l - \tilde{\mu}_{kjim,k} n_j - \tilde{\mu}_{kjim,j} n_k \\ &\quad + (D_p n_p) \tilde{\mu}_{kjim} n_j n_k + (D_j n_k) \tilde{\mu}_{kjim} \end{aligned} \quad (6-27)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \tilde{U}^*}{\partial \hat{n}^x} \right)_{im} &= \tilde{U}_{im,k}^* n_k^x \\ \left(\frac{\partial \tilde{Q}^*}{\partial \hat{n}^x} \right)_{im} &= \tilde{Q}_{im,k}^* n_k^x = (\tilde{U}_{im,kq}^* n_k + \tilde{U}_{im,k}^* n_{k,q}) n_k^x \\ \left(\frac{\partial \tilde{R}^*}{\partial \hat{n}^x} \right)_{im} &= \tilde{R}_{im,k}^* n_k^x = g^2 (\tilde{\tau}_{jim,kq} n_k n_j + \tilde{\tau}_{jim,k} n_{k,q} n_j + \tilde{\tau}_{jim,k} n_k n_{j,q}) n_k^x \\ \left(\frac{\partial \tilde{P}^*}{\partial \hat{n}^x} \right)_{im} &= \tilde{P}_{im,k}^* n_k^x = (\tilde{\tau}_{jim,q} n_j + \tilde{\tau}_{jim,k} n_{j,q}) n_q^x \\ &\quad + g^2 [\tilde{\tau}_{jim,klq} n_j n_k n_l + \tilde{\tau}_{jim,kl} (n_{j,q} n_k n_l + n_j n_{k,q} n_l + n_j n_k n_{l,q})] n_q^x \\ &\quad - g^2 (\tilde{\tau}_{jim,kkq} n_j + \tilde{\tau}_{jim,kk} n_{j,q}) n_q^x - g^2 (\tilde{\tau}_{jim,kjq} n_k + \tilde{\tau}_{jim,kj} n_{k,q}) n_q^x \\ &\quad - g^2 \{ (D_p n_p)_{,q} \tilde{\tau}_{jim,k} n_j n_k + D_p n_p [\tilde{\tau}_{jim,kq} n_j n_k + \tilde{\tau}_{jim,k} (n_{j,q} n_k + n_j n_{k,q})] \} n_q^x \\ &\quad + g^2 (\tilde{\tau}_{jim,kq} n_j + \tilde{\tau}_{jim,k} n_{j,q}) n_q^x \\ &\quad - g^2 \{ n_{k,lq} \tilde{\tau}_{jim,k} n_j n_l + n_{k,l} [\tilde{\tau}_{jim,kq} n_j n_l + \tilde{\tau}_{jim,k} (n_{j,q} n_l + n_j n_{l,q})] \} n_q^x \end{aligned} \quad (6-28)$$